

## 1. 搜索

物质	
特性	注释
根据文本内容 <b>Quick search</b> (参见第 3 页)	在检索字段中输入物质名称、分子式或者化学文摘号，并点击 <b>Search</b> 。 示例： <ul style="list-style-type: none"> <li>• Atenolol</li> <li>• Pt(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub></li> <li>• 102625-70-7</li> </ul>
通过画结构或反应示意图进行 <b>Quick search</b> (参见第 3 页和第 4 页)	1. 点击 <b>Create Structure or Reaction Drawing</b> 框。 2. 创建物质的结构图。 关于使用 Marvin JS 结构编辑器的更多信息，请参见： <ol style="list-style-type: none"> <li>在 <a href="#">物质搜索</a> 工作流程中创建结构查询。</li> <li>查看我们的 <a href="#">ChemAxon Marvin JS 应用技巧</a></li> <li>请访问 <a href="#">ChemAxon Marvin JS</a> 网站，获取网站上的 <a href="#">MarvinJS 用户指南</a>。</li> </ol> 3. 点击 <b>Transfer to query</b> ，然后点击 <b>Search</b> 。
<b>Query builder</b> (参见第 5 页和第 6 页)	1. 点击 <b>Query builder</b> (参见第 6 页)。 2. 在搜索键下方选择一项快速查询条件 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index)。 <b>或者</b> 2. 通过 <b>Search properties</b> 字段检索物质性质，并将物质性质拖放至 <b>Query builder</b> 。 3. 如果有多个搜索字段，可使用适当的布尔运算符 (参见第 7 页)。 4. 点击屏幕上方的 <b>Search</b> ，并选择希望搜索的目标内容：如 <b>Substances</b> 。 <b>注意：</b> 点击 <b>Exist</b> ，输入具体的搜索值。

反应	
特性	注释
根据文本内容 <b>Quick search</b> (参见第 3 页)	在检索字段中键入一个或多个术语，并点击 <b>Search</b> 。 示例： <ul style="list-style-type: none"> <li>• preparation of porphyrine</li> <li>• phosphorylation</li> <li>• Suzuki coupling</li> <li>• Adler phenol oxidation</li> </ul>
通过画结构或反应进行 <b>Quick search</b> (参见第 3 页和第 4 页)	1. 点击 <b>Create Structure or Reaction Drawing</b> 框。 2. 画反应结构图关于使用 Marvin JS 结构编辑器的更多信息，请参见： <ol style="list-style-type: none"> <li>在 <a href="#">反应搜索</a> 工作流程中创建反应查询。</li> <li>查看我们的 <a href="#">ChemAxon Marvin JS 应用技巧</a></li> <li>请访问 <a href="#">ChemAxon Marvin JS</a> 网站，获取网站上的 <a href="#">MarvinJS 用户指南</a></li> </ol> 3. 点击 <b>Transfer to query</b> ，然后点击 <b>Search</b> 。
<b>Query builder</b> (参见第 5 页和第 6 页)	1. 点击 <b>Query builder</b> (参见第 6 页)。 2. 在搜索键下方选择一项快速查询条件 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index)。 <b>或者</b> 2. 通过 <b>Search properties</b> 字段检索性能，并将性能拖放至 <b>Query builder</b> 。 3. 如果有多个搜索字段，可使用适当的布尔运算符 (参见第 7 页)。 4. 点击屏幕上方的 <b>Search</b> ，并选择希望搜索的目标内容：如 <b>Reactions</b> 。 <b>注意：</b> 点击 <b>Exist</b> ，输入具体的搜索值。

## 搜索（继续）

参考文献	
特性	注释
<b>Quick search</b> (参见第 3 页)	在搜索框中键入一个或多个术语，并点击 <b>Search</b> 。 示例： <ul style="list-style-type: none"> <li>• publications about quasicrystals</li> <li>• Tetrahedron, 2014, 70, 2343</li> <li>• published by Schrock</li> </ul>
通过画结构或反应进行 <b>Quick search</b> (参见第 3 页和第 4 页)	<b>注意：</b> 任何一个结构查询或者反应查询（参见页 1）都将主要查找出物质或者反应。查询结果中的任何一个数据点都有一个参考文献，该参考文献为文件提供了附加链接。 此外，您可以点击页面上方的文件链接，以查看查询结果集的文件。
<b>Query builder</b> (参见第 5 页和第 6 页)	1. 点击 <b>Query builder</b> （参见第 6 页）。 2. 在搜索键下方选择一项快速查询条件（Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index）。 <b>或者</b> 2. 通过 <b>Search properties</b> 字段检索物质性质，并将物质性质拖放至 <b>Query builder</b> 。 3. 如果有多个搜索字段，可使用适当的布尔运算符（参见第 7 页）。 4. 点击屏幕上方的 <b>Search</b> ，并选择希望搜索的目标内容：如 <b>Documents</b> 。 <b>注意：</b> 点击 <b>Exist</b> ，输入具体的搜索值。

性质	
特性	注释
<b>Quick search</b> (参见第 3 页)	在搜索框中键入术语，并点击 <b>Search</b> 。 示例： <ul style="list-style-type: none"> <li>• boiling point of benzene</li> <li>• density of quinolone</li> </ul>
通过画结构或反应进行 <b>Quick search</b> (参见第 3 页和第 4 页)	1. 点击 <b>Create Structure or Reaction Drawing</b> 框。 2. 创建物质的结构图。 关于使用 Marvin JS 结构编辑器的更多信息，请参见： a. 在 <a href="#">物质搜索</a> 工作流中创建结构化查询。 b. 查看我们的 <a href="#">ChemAxon Marvin JS 应用技巧</a> c. 请访问 <a href="#">ChemAxon Marvin JS</a> 网站，获取网站上的 <a href="#">MarvinJS 用户指南</a> 3. 点击 <b>Transfer to query</b> 。 4. 在搜索框中键入性能（如 boiling point）。 5. 点击 <b>Search</b> 。
<b>Query builder</b> (参见第 5 页和第 6 页)	1. 点击 <b>Query builder</b> （参见第 6 页）。 2. 在搜索键下方选择一项快速查询条件（Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index）。 <b>或者</b> 2. 通过 <b>Search properties</b> 字段检索物质性质，并将物质性质拖放至 <b>Query builder</b> 。 3. 根据需要重复查询其他的性能。 4. 如果有多个搜索字段，可使用适当的布尔运算符（参见第 7 页）。 5. 点击屏幕上方的 <b>Search</b> ，并选择希望搜索的目标内容：如 <b>Substances</b> 。 <b>注意：</b> 点击 <b>Exist</b> ，输入具体的搜索值。

## Quick search

您可在文本搜索选项中输入自然术语（术语可能截去左端，右端或中端，以星号标注（通配符检索））。

你可以在结构搜索选项中画出物质和反应图并进行搜索。

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Elsevier Reaxys

Search substances, reactions, citations and bioactivity data

Reactions, e.g. Suzuki coupling

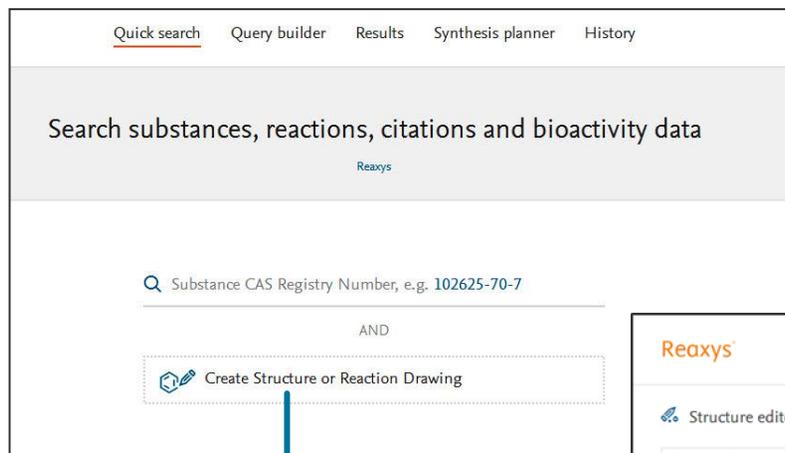
AND

Create Structure or Reaction Drawing

Search >

Feedback

## 通过画结构或反应 Quick search



1. 点击 **Create Structure or Reaction Drawing** 框。

2. 使用 ChemAxon's Marvin JS 工具来绘出结构或者反应。

Reaxys Quick search Query builder Results Synthesis planner History Elsevier Reaxys

Structure editor

Create structure template from name >

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar

Include

- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

+ More options

Clear Cancel Transfer to query Feedback

The structure editor shows a chemical reaction: C=C(C)C (an alkene) reacting to form OC(=O)C(C)C (a carboxylic acid). The reaction arrow points from the alkene to the carboxylic acid.

## Query builder Fields 和 Forms 面板

在此处输入术语以查找字段名称。如输入 **boil**, 可以查找 **boiling point**。

默认显示字段

点击 **Forms**, 显示物质一般性质的默认字段。

点击 **▾**, 扩展出字段列表

The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. At the top, there is a navigation bar with 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below this is a search bar with a dropdown arrow. The main area is divided into two panels: 'Fields' and 'Forms'. The 'Fields' panel is currently active, showing a list of categories with dropdown arrows: 'Basic Indexes', 'Identification', 'Physical Properties', 'Spectra', 'Pharmacological Data', 'Ecotoxicology', 'Other', 'Reactions', and 'Bibliography'. A 'Feedback' button is visible at the bottom right of the 'Fields' panel. The 'Forms' panel is currently empty, showing a 'Drag & Drop to build a new query' instruction. The interface also includes icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete' on the left side, and 'Structure', 'Molecular Formula', 'CAS RN', and 'Doc. Index' on the right side.

## Query builder 步骤

1. 点击 **Query builder**。

2. 开始输入性能名称，如在 **Search Properties** 区域内输入 **boiling**。

3. 将物质性质拖放至 **Query builder**。

4. 点击 **Exist**。

5. 明确具体的搜索条件。

6. 点击 **Search (物质)**。

The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Query builder' tab selected. The 'Search properties' panel on the right contains 'boil'. The 'Query builder' area has two conditions: 'Boiling Point, °C' with a value of '60-80' and 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a value of '740-760'. The 'Exist' button is visible above the conditions. The 'Search' button is located in the top navigation bar.

## Query builder: 多个物质性质和布尔运算

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. At the top, there are navigation tabs: Quick search, Query builder (selected), Results, Synthesis planner, and History. The user is logged in as Elsevier Reaxys. Below the navigation, there are icons for Import, Save, Reset form, and Delete. A search bar contains the text 'melt'. To the right, a 'Search properties' dropdown is open, showing options: Derivative, Melting Point, and Physical Data. The main query area has two filters: 'Boiling Point' with a value of '60-80' and 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a value of '740-760'. Below this, a 'Melting Point' filter is partially visible. A dropdown menu for Boolean operations is open, showing options: OR, AND (selected), NOT, and PROXIMITY. A blue arrow points from the 'AND' option to a text box on the right.

Click the required Boolean operation

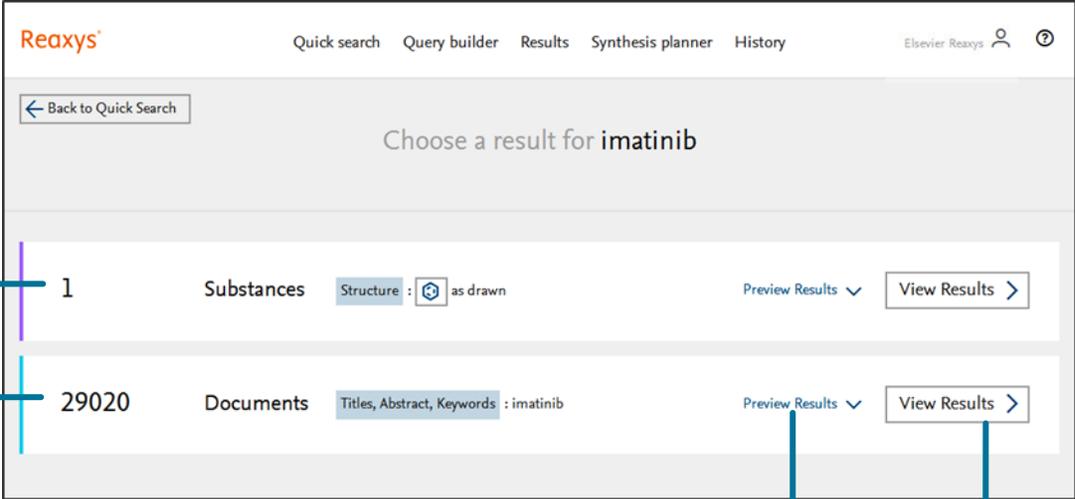
- **OR**: 至少包含一个字段内的数据
- **AND**: 包含两个字段内都含有的数据
- **NOT**: 包含第一个字段内的数据，同时排除第二个字段
- **NEAR**: 就近搜索术语，但不限顺序
- **NEXT**: 就近搜索术语，但指定顺序
- **PROXIMITY**: 利用参数字段的典型查询，确保两个字段的内容互具相关性（如 melting point 和 solvent）

## 2. 结果

### Quick search 结果预览

Reaxys 可以分析 **Quick search** 中输入的查询条件，可以预览一系列查询结果（注意：由于查询解析的独特性质，只有 **Quick search** 查询会出现一个结果预览）。

结果集取决于输入的术语。在这种情况下，Reaxys 会识别该物质名称，。在数据库的物质记录中，通过结构搜索物质。在文档记录中搜索物质名称。



该选项说明此处有 1 个物质记录  
—通过对结构的精确查找得知。

该选项说明此处有超过 28,000 个文  
件记录—通过文本术语查询得知。

点击 **Preview Results**，查看  
结果集合中的前三个查询结  
果。

点击 **View Results**，查看结  
果集合中所有的查询结果。

在其他情况下，输入不同的检索词组合，**Reaxys 检索**可能会给出一些选项，显示**反应记录**或**文档记录**。

## Quick search 或 Query builder 的结果—物质

使用 **Filters and Analysis** 精简查询结果。

通过“面包屑途径”对检索项目保持记录。

点击 **More**，显示更多选项。

The screenshot shows the Reaxys search results page. On the left, the 'Filters and Analysis' sidebar is expanded, showing various filters such as 'Substances Classes', 'Molecular Weight', 'Availability', and 'Available data'. The main content area displays '4 Substances' out of 3,228 Documents containing 1,555 Reactions. The first substance listed is 'ibuprofen', with its chemical structure and a list of related information: 'Preparations - 186', 'Reactions - 1179', 'Documents - 2998', 'Spectra - 273', 'Physical Data - 616', 'Bioactivity - 1634', and 'Other Data - 3369'. The second substance is '(S)-ibuprofen', with its chemical structure and related information: 'Preparations - 168', 'Reactions - 395', 'Documents - 382', 'Spectra - 86', 'Physical Data - 181', 'Bioactivity - 229', and 'Other Data - 155'. A 'Feedback' button is located at the bottom right of the main content area.

默认根据参考文献的数量确定显示内容，但也可选择其他选项。滑动条可以放大结构图。

点击相关链接，查看制备和反应信息，以及文件（文献）记录。

单击链接查看该物质的特定信息。

## Quick search 或 Query builder 结果—文件

通过使用 **Filters and Analysis** 精简结果。

使用 **Index Terms** 精简与主题相关的文献资料。

点击作者链接，可查看他们发表的文章，以及 **Scopus** 数据库中其他的分析选项。

。默认按照相关度排序，但也可以按照其他方式排序

点击链接，查看 **Scopus** 数据库中的引用次数。

点击链接，查看 **Full Text**、**Front Page Info**（专利文献）、**Substances**、**Reactions**、**Abstract** 或 **Index Terms**。

### 3. 分析和过滤

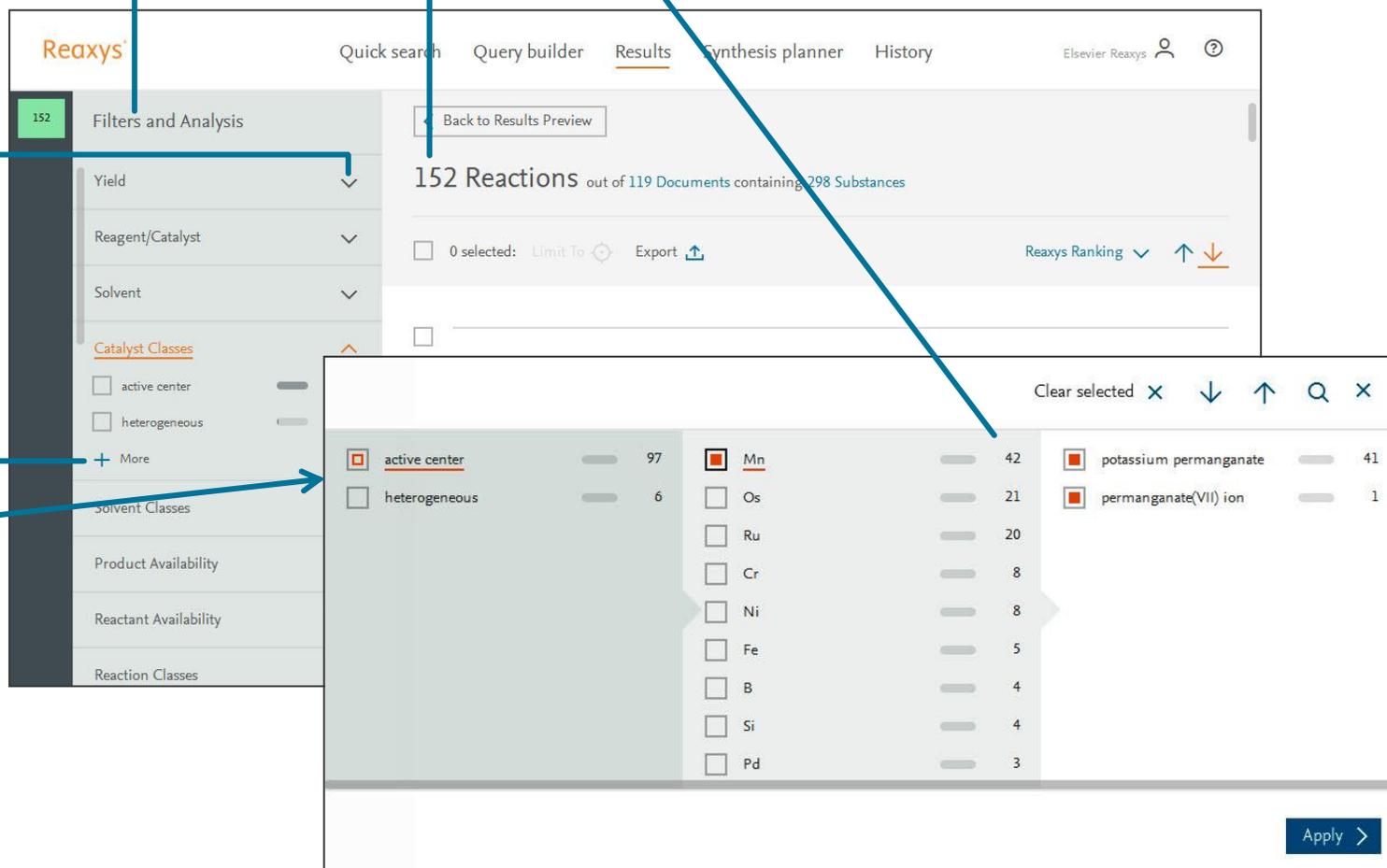
使用 **Filters and Analysis** 面板进一步精简结果:

使用 **Filters and Analysis** 精简查询结果。索引词具备系统性，是筛选记录的明智之选。

1. 点击 ，显示其他区域内的过滤和分析选项。

2. 点击 **More**，显示更多的过滤选项。

3. 采用该过滤方式可将原来的 152 项反应过滤至 42 项。

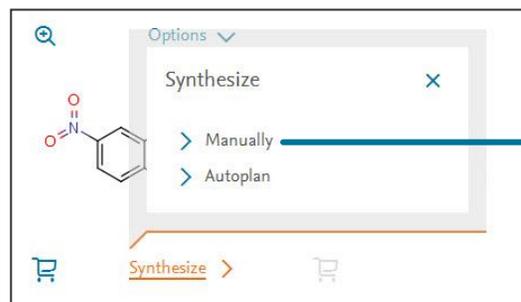


The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Filters and Analysis' panel open. The panel displays 152 reactions. A list of filters is shown on the left, including Yield, Reagent/Catalyst, Solvent, and Catalyst Classes. The 'Catalyst Classes' section is expanded, showing a list of filters with their respective counts. The 'More' button is highlighted, indicating that more filters are available. A detailed view of the selected filters is shown in a pop-up window, listing filters such as 'active center', 'heterogeneous', 'Mn', 'potassium permanganate', and 'permanganate(VII) ion' with their respective counts.

Filter	Count
active center	97
heterogeneous	6
Mn	42
potassium permanganate	41
permanganate(VII) ion	1
Os	21
Ru	20
Cr	8
Ni	8
Fe	5
B	4
Si	4
Pd	3

## 4. Synthesis Planner —Manually

手动建立一个合成途径，或者让 Reaxys 自动构建（参见页面 14）。首先，点击结构下方的 **Synthesize**。



1. 点击 **Manually**。

2. 在 **Add preparation** 窗内，选择反应加入到您的设计方案中。  
注意：图中不会显示产物结构，因为它和起始结构一样。

3. 点击 **Add # to plan**。

Yield	Preparation
<input checked="" type="checkbox"/>	1 
<input type="checkbox"/>	2 
<input checked="" type="checkbox"/>	3 

Cancel X Add 2 to plan >

## Synthesis Planner —Manually (继续)

1. 在 **Synthesis planner** 内点击合成计划并查看。

- i Show conditions
- 🚫 Hide preparation
- 🗑️ Remove preparation

3. 点击 **Show conditions**。

选定的制备步骤的实验细节在此显示，上拉或向下滚动，可以查看合成设计中的其他步骤的一些细节。

2. 点击合成步骤选项 (⋮)，进入：

- Show conditions
- Hide preparations
- Add preparations
- Remove preparations

**Conditions**

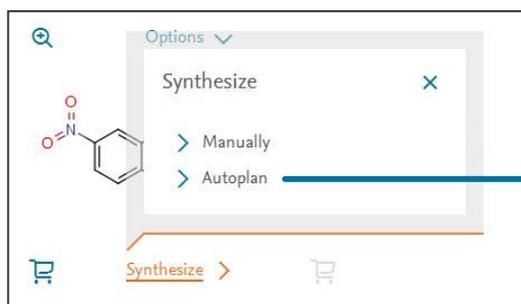
Preparation - 1b

Yield	Conditions	Reference
64%	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate <b>With</b> DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Inert atmosphere Stage #2: <b>With</b> pyridine; phosphoryl chloride at 0 - 20°C Experimental Procedure <span style="font-size: 0.8em;">v</span>	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, <b>2012</b> , vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 13 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>
	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate <b>With</b> DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Stage #2: <b>With</b> pyridine; phosphoryl chloride at 20°C for 3h Experimental part Experimental Procedure...	Makrecka, Marina; Zalubovskis, Raivis; Vavers, Edijs; +3 others - Letters in Drug Design and Discovery, <b>2013</b> , vol. 10, # 5, p. 410 - 414 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 1 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>

**Done** [>](#)

## Synthesis Planner — Autoplan

使用 Reaxys 自动创建一个合成途径。首先，点击结构下方的 **Synthesize**。



1. 点击 **Autoplan**。

2. 明确需自动生成的合成途径的参数。

3. 点击 **Create Plans**。

Parameter	Value
Number of plans to create	2
Max. alternative branches	3
Max. number of steps	3
Stop searching if starting material is commercially available	No
Default yield for reactions without a given yield	Slider

Always show screen before creating autoplan

**Create Plans** >

## Synthesis Planner —Autoplan (继续)

1. 在 **Synthesis planner** 内点击设计并查看。

The screenshot displays the Reaxys Synthesis Planner interface. On the left, a sidebar shows 'Plan 1' and 'Plan 2'. The main area shows a reaction scheme with four steps. Step 2 is highlighted with a blue box. A 'Conditions' pop-up window is open, showing details for 'Preparation - 2'.

**2. 点击合成步骤选项 (⋮), 进入:**

- Show conditions
- Hide preparations
- Add preparations
- Remove preparations

**3. 点击 Show conditions.**

选定的制备步骤的实验细节在此显示, 上拉或向下滚动, 可以查看合成设计中的其他步骤的一些细节。

Yield	Conditions	Reference
100%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 2h Experimental part	Grandane, Aiga; Tanc, Muhammet; Di Cesare Mannelli, Lorenzo; +4 others - Journal of Medicinal Chemistry, 2015, vol. 58, # 9, p. 3975 - 3983 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 5 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>
99%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 22.1667h Experimental Procedure <a href="#">v</a>	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012, vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 13 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>

## 5. 保存和导出

特性	注释
<b>保存</b>	
从 <b>Query builder</b> 保存	明确查询，点击左上角的 <b>Save</b> 。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 查询已存至 .json 文件中。</li> </ul>
从 <b>Synthesis planner</b> 保存	尚不可存。
从 <b>History</b> 页面和 <b>Recent</b> 栏保存	在 <b>History</b> 页面和 <b>Recent</b> 栏中存有您当前在 Reaxys 内查找的一系列的结果。  在 <b>Recent Search</b> 处悬停，点击 <b>Save</b> ，输入一个名称，点击 <b>Save</b> 。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 已存的查询结果现在可以在 <b>Saved</b> 栏中找到。</li> </ul>
<b>导出</b>	
从 <b>结果页面</b> 导出：	勾选搜索结果的数量，选中您想要导出的文件。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 点击 <b>Export</b>。</li> <li>• 明确 <b>Format, Range, Export data</b> 以及 <b>Additional options</b>。</li> <li>• 点击 <b>Export</b>。</li> <li>• 如若想查看导出进度，点击屏幕右下角的 <b>Exports</b>。  <ul style="list-style-type: none"> <li>○ 当导出完成，点击 <b>Download</b>。</li> </ul> </li> </ul>
从 <b>Synthesis planner</b> 保存：	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 点击 <b>Export</b>。</li> <li>• 点击 <b>Export documents</b> 或 <b>Export reactions</b>。</li> <li>• 明确 <b>Format</b> 以及 <b>Additional options</b>。</li> <li>• 点击 <b>Export</b>。</li> <li>• 如若想查看导出进度，点击屏幕右下角的 <b>Exports</b>。  <ul style="list-style-type: none"> <li>○ 当导出完成，点击 <b>Download</b>。</li> </ul> </li> </ul>